

2010 年度 修士論文要旨

# 半導体材料の二次元欠陥の第一原理計算

関西学院大学大学院理工学研究科

情報科学専攻 西谷研究室 戸賀瀬 健介

本研究では、半導体の結晶表面や積層欠陥等の二次元欠陥を対象に、第一原理計算ソフトVASPを用いてエネルギー計算を行った。具体的には、シリコン(Si)中に含まれる積層欠陥エネルギーを見積もり、さらにドーパされたリン(P)がSi中の積層欠陥に与える影響を調べた。一方で、シリコンカーバイド(SiC)において、環境依存を考慮した精密な表面エネルギー計算からマイクロパイプ欠陥の生成起源を調べた。

Siは半導体素子として広く普及している材料である。Czochralski法(CZ法)で生成されたSi単結晶はほとんど転位を含まず、商業化が可能であるが、デバイスの製造工程中に、頻繁に転位が発生する。転位は半導体デバイス中に含まれるとリーク電流の原因となることが知られており、Siテクノロジーにおいて転位の抑制・制御が求められている。一本の完全転位がリボン状に拡張すると、2本の部分転位に別れ、その間は積層順序の乱れた積層欠陥になることが知られている。最近、東北大学研のY. Ohnoらは、Si中の積層欠陥が、ドーパされたPが欠陥部に集まることで安定すると報告した。本研究では、この現象を説明するため、第一原理計算を行った。まず単純にSiバルクにおいて、Diamond構造とWurtzite構造のエネルギー差を計算した。そしてSiバルク中の一原子をPに置換し、同様の計算を行い、Pが含まれた系とSiのみの系の積層欠陥エネルギーを見積もった。次に、Diamond構造のSiバルク中にglide-set転位における積層欠陥を入れたモデルを作成した。そしてモデル中の一層をPに置換し、エネルギーを計算し、Pが安定となる層の位置を探った。結論としてSi中にPが含まれると、積層欠陥が安定し、さらにPは積層欠陥部に集まり易いことが示唆され、Y. Ohnoらの報告と整合した。

次世代パワー半導体材料として注目されているSiCの単結晶成長には、Lely法と呼ばれる気相成長法が主に用いられている。しかし、この手法で成長させたSiC単結晶には、リーク電流の原因となるマイクロパイプ欠陥が{0001}面上に多数確認されている。最近、関西学院大・金子らが、準安定溶媒エピタキシー(MSE: Metastable Solvent Epitaxy)と呼ばれる新奇なSiC単結晶成長法を開発した。この手法で成長させたSiC単結晶の{0001}面には、マイクロパイプ欠陥は無く、平坦に成長している。マイクロパイプ欠陥の生成機構は、Frankによる超格子転位を起源とする説が有力であるが、本研究では両手法には成長環境の違いに着目した。Lely法では黒鉛坩堝を用いているので、気体溶媒中に大量の炭素(C)が溶け出し、成長環境はC-richと考えられる。一方、MSE法の成長環境は種結晶が液体Siに覆われているため、Si-richである。環境によってその値が変わる物性として表面エネルギーが知られており、これは静的な要因として結晶成長を支配している。本研究では、精密な第一原理計算によって、SiCの環境に依存した表面エネルギーを計算し、SiCの単結晶成長においてマイクロパイプ欠陥が生じる新たなモデルを提案した。具体的な計算として、SiCの{0001}面とそれに直交する{11-20}面、{1-100}面の表面エネルギーを求めた。その手法として、バルクモデルと真空-固体界面を有するスラブモデルのエネルギー差から表面エネルギーを計算した。またSi面、C面が交互に現れる{0001}面は、環境による表面エネルギーへの影響が大きい。Si-rich、C-rich環境下での{0001}面の表面エネルギーを精密に計算するため、本研究では、Si、Cそれぞれで表面が覆われたスラブモデルを作成し、化学ポテンシャルの概念を利用した。そして、{0001}面と直交する2面の表面エネルギーを比較すると、Si-richでは{0001}面が安定、C-richでは{0001}面が不安定であるという結果が得られた。この結果は、Si-richでは、{0001}面の表面積が大きくなるように結晶成長するため、{0001}面上に生じたマイクロパイプ欠陥は拡散原子によって埋め立てられ、閉塞していくことを示唆しており、C-richでは、{0001}面上で拡散原子が結晶に取り込まれ、マイクロパイプ欠陥を維持したまま結晶成長するため、欠陥濃度が高くなることを示唆している。